第三章　完全转动群

Symmetry:　sym, syn(希腊语:共同，相同) + metron (度量)

几何学：　一个物体经过一个变换（transformation），仍能和以前看起来一样。

3.1 三维空间中的正交群

三维转动矩阵

定义 （1）矢量的转动

矢量变换 A： 三维空间中的算符

$$A\vec{r} = \vec{r}', A\vec{s} = \vec{s}'$$

且有

$$(A\vec{r} \cdot A\vec{s}) = (\vec{r} \cdot \vec{s})$$

保持两个矢量的内积在变换前后的内积不变： A为转动算符

在三维空间中选定一组基矢$\vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k}$

任一矢量可由三个实数来确定

$$\vec{r} = \vec{\imath}x + \vec{\jmath}y + \vec{k}z,$$
$$\vec{r}' = \vec{\imath}x' + \vec{\jmath}y' + \vec{k}z',$$

用列矩阵 $\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$ 及 $\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}$ 表示矢量$\vec{r}$ 及 $\vec{r}'$，我们可以得到$A\vec{r} = \vec{r}'$

三维转动矩阵,
矩阵元为实数

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z \end{bmatrix}$$

（2）基矢的转动

- 三维空间中的算符 B 作用在基矢 $\vec{\imath},\vec{\jmath},\vec{k}$上，保持其正交

  归一关系不变，得到一组新的基矢 $\vec{\imath}',\vec{\jmath}',\vec{k}'$ ，新基矢由旧基矢转动而来，满足关系式

$$\left(\vec{\imath}' \;\; \vec{\jmath}' \; \vec{k}'\right) = \left(\vec{\imath} \;\; \vec{\jmath} \;\; \vec{k}\right)B$$

矩阵形式

$$\left(\vec{\imath}' \;\; \vec{\jmath}' \; \vec{k}'\right) = \left(\vec{\imath} \;\; \vec{\jmath} \;\; \vec{k}\right)\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix}$$

- 空间任一矢量可在新旧坐标系表示出：

$$\vec{r} = \vec{\imath}x + \vec{\jmath}y + \vec{k}z = \vec{\imath}'x' + \vec{\jmath}'y' + \vec{k}'z'$$

$$\begin{bmatrix}\vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\vec{\imath}' & \vec{\jmath}' & \vec{k}'\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x'\\y'\\z'\end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix}\vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k}\end{bmatrix}B \quad A\begin{bmatrix}x\\y\\z\end{bmatrix}$$

（单位阵）

$$BA = I_0 \Rightarrow B = A^{-1}$$

坐标系不动转动矢量的操作 等效于 矢量不动反向转动坐标系的操作

转动矩阵的性质

- 1， A是么正阵，

$$(\vec{r},\vec{s}) = (\vec{r}\,',\vec{s}\,') = (A\vec{r},A\vec{s}) = \left(\vec{r},A^{\dagger}A\vec{s}\right)$$

$$(A\vec{r})^{\dagger}\cdot A\vec{s} = \vec{r}^{\dagger}A^{\dagger}A\vec{s}$$

$$\begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \end{bmatrix} A^{\dagger}A\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

$A^{\dagger}A = AA^{\dagger} = 1$ 保持两个矢量内积不变的充要条件

2，矩阵元之间存在正交归一关系

$$A^{\dagger}A = AA^{\dagger} = 1$$

$$\sum_j A^{\dagger}{}_{ij}\, A_{jk} = \delta_{ik}$$

$$\sum_j A_{ij}\, A^{\dagger}{}_{jk} = \delta_{ik}$$

实矩阵

$$\sum_j A_{ji}\, A_{jk} = \delta_{ik}$$

列正交

$$\sum_j A_{ij}\, A_{kj} = \delta_{ik}$$

行正交

实幺正阵为正交矩阵

- 3，转动矩阵的行列式 $\det A = \pm 1$

$$\tilde{A}A = A\tilde{A} = 1$$

$$\det(\tilde{A}A) = \det(A\tilde{A}) = \det \tilde{A} \det A = (\det A)^2 = I_0$$

$\det A = 1$，　　正当转动 R

$\det A = -1$，　　非正当转动 S

行列式是线性变换的放大率

$$\frac{V_1}{V_2} = \det A, \quad n\text{ 维空间体积变换前后比}$$

$\det A = 0$, 降维，n维体积为 0，“拍扁”了，无逆阵。

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix}$$

$$\vec{C}_1 = (C_{11}, C_{12}, C_{13}), \vec{C}_2 = (C_{21}, C_{22}, C_{23}), \vec{C}_3 = (C_{31}, C_{32}, C_{33}),$$

$$V_1 = \vec{C}_1 \cdot (\vec{C}_2 \times \vec{C}_3) = \det C$$

同理，$V_2 = \vec{B}_1 \cdot (\vec{B}_2 \times \vec{B}_3) = \det B$

$$\therefore \det A = \frac{\det C}{\det B} = \frac{V_1}{V_2}$$

正当转动

Orthogonal

- 正当转动群$SO(3)$

Special：$\det R = 1$ 的转动 R 的集合构成群。

验证：1，集合$\{R\}$具有封闭性

$$\det(R_i R_j) = \det R_i \det R_j = 1,$$

2，存在逆元，$R^{-1} = R^{\dagger} = \tilde{R}$

$$\det R^{-1} = \det\tilde{R} = \det R = 1,$$

3，存在单位元，$R^{-1}R = RR^{-1} = E \in \{R\}$

4，矩阵乘法满足结合律

- 正当转动相当于刚体转动：
  考虑坐标轴不动而刚体绕某轴转过一个角φ
  的转动矩阵 $R(\vec{u},\varphi)$

$\vec{u}$: 转轴方向上的单位矢量

定义并矢

$$\overleftrightarrow{R} = \vec{i}\,\vec{i}R_{11} + \vec{i}\,\vec{j}R_{12} + \vec{i}\,\vec{k}R_{13}$$

$$+ \vec{j}\,\vec{i}R_{21} + \vec{j}\,\vec{j}R_{22} + \vec{j}\,\vec{k}R_{23}$$

$$+ \vec{k}\vec{i}R_{31} + \vec{k}\vec{j}R_{32} + \vec{k}\vec{k}R_{33}$$

并矢的九个分量就是转动矩阵的九个矩阵元

定义 $$\overleftrightarrow{I} = \vec{i}\,\vec{i} + \vec{j}\,\vec{j} + \vec{k}\,\vec{k}$$

问： $$\overleftrightarrow{I} \times \vec{u} = ?$$

$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ u_i & u_j & u_k \end{vmatrix}$$

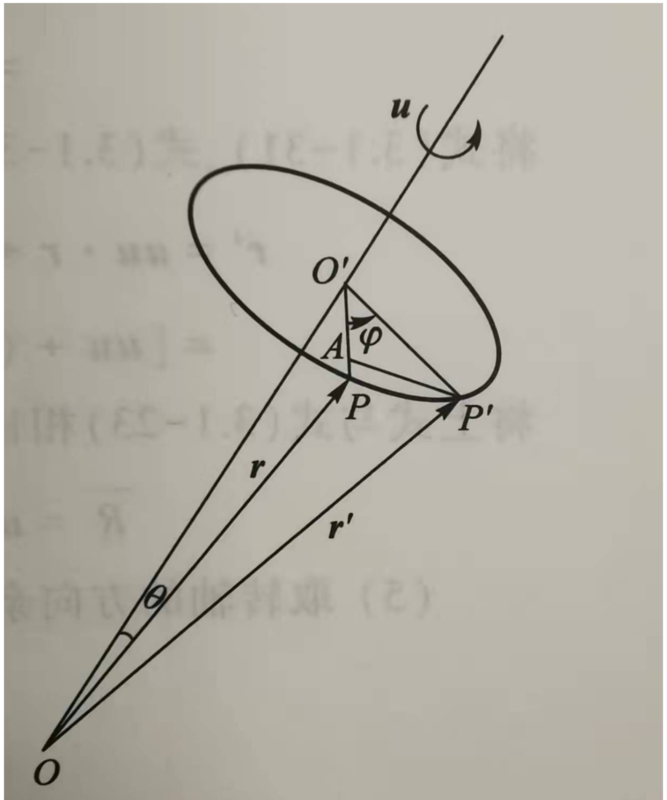


图 3.1

$$\vec{r}' = \overleftrightarrow{R}\vec{r}$$

利用几何关系求取转动矩阵元

$$\vec{u} = \vec{i}\lambda + \vec{j}\mu + \vec{k}\nu$$

λ，μ，ν：方向余弦

$$\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2 = 1$$

$$R=\begin{pmatrix}\cos\varphi+\lambda^2(1-\cos\varphi) & \lambda\mu\,(1-\cos\varphi)-\nu\sin\varphi & \lambda\nu\,(1-\cos\varphi)+\mu\sin\varphi \\ \lambda\mu\,(1-\cos\varphi)+\nu\sin\varphi & \cos\varphi+\mu^2(1-\cos\varphi) & \mu\nu\,(1-\cos\varphi)-\lambda\sin\varphi \\ \lambda\nu\,(1-\cos\varphi)-\mu\sin\varphi & \mu\nu\,(1-\cos\varphi)+\lambda\sin\varphi & \cos\varphi+\nu^2(1-\cos\varphi)\end{pmatrix}$$

$$\det R=1,$$

刚体转动都是正当转动

$$\lambda^2+\mu^2+\nu^2=1$$

三个分量不独立，以λ，μ 表示转动方向， φ为转角

得到了以三个参数标识的任一转动的转动矩阵

非正当转动

- 非正当转动的行列式

$$\det S = -1,$$

非正当转动不能构成群，连续两次非正当转动行列式为 1

中心反演 I

$$\vec{r}' = I\vec{r} = -\vec{r} \qquad I\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

反演转动矩阵

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- 镜面反射 σ （镜象）

镜面与转轴垂直：水平镜面反射σ_h

$$\sigma_h = IC_2 = C_2 I$$

$$C_2 = I\sigma_h = \sigma_h I$$

绕垂直轴转过 π 角

一个正当转动与I 或 σ 的连续作用是一个非正当转动；

一个非正当转动与I 或 σ 的连续作用是一个正当转动

$$S = IR = RI$$

非正当转动是刚体转动所不能实现：

在不改变矢量的长度和夹角的情况下，把右手系换成左手系。

- 正当转动：

$$\vec{z} = \vec{x} \times \vec{y}$$

$$R\vec{z} = R\vec{x} \times R\vec{y}$$

- 非正当转动：

$$I\vec{x} = -\vec{x}$$

$$S\vec{z} = -S\vec{x} \times S\vec{y}$$

负号来源于当我们保持右手螺旋的叉乘习惯

$$S\vec{z} = S\vec{x} \times S\vec{y}$$ （左手螺旋）

三维空间中的正交群

- 全部正当转动 + 全部非正当转动

------ 三维空间中的正交群（三维转动反演群）： $O(3)$

$SO(3)$：三维完全转动群

$SO(3)$ 是 $O(3)$ 的不变子群

$I^2 = E,\qquad C_i = \{E, I\}$是二阶非正当转动群

也是 $O(3)$ 的不变子群

$$\boxed{O\ (3) = SO\ (3) \otimes C_i}$$

可由 $SO(3)$ 和 C_i 的不可约表示得到$O(3)$ 群的不可约表示

3.2 完全转动群$SO(3)$ 的不可约表示

- 函数变换算符P_R

（1）考察与转动$R(z,\theta)$ 相应的算符$P_{z,\theta}$

Z轴的方向余弦：

$$\lambda = \mu = 0, \nu = 1$$

$$R\,(z,\delta\theta) = \begin{pmatrix} \cos\delta\,\theta & -\sin\delta\,\theta & 0 \\ \sin\delta\,\theta & \cos\delta\,\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{无穷小变换}]{\delta\theta \to 0} \begin{pmatrix} 1 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R\ (z, \delta\theta)^{-1} = R\ (z, -\delta\theta)$$

$$R\ (z, \delta\theta)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta & 0 \\ -\delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} P_{z,\delta\theta}\psi(\vec{r}) &= \psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi(x + y\delta\theta, y - x\delta\theta, z) \\ &= \psi(x,\ y,\ z) + y\delta\theta\,\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\delta\theta\,\frac{\partial\psi}{\partial y} \\ &= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{(-i\hbar)(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})}]\psi(x,\ y,\ z) \\ &= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{\hat{L}_z}]\psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Reduce to $x - y$ plane,
Change to polar coordinates:

$$P_{z,\delta\theta}\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi(r, \theta - \delta\theta)$$

$$= \psi(r,\theta) - \delta\theta \frac{\partial\psi(r,\theta)}{\partial\theta} + \frac{(\delta\theta)^2}{2\,!}\frac{\partial^2\psi(r,\theta)}{\partial\theta^2} + \cdots$$

$$= \left[1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial\theta}}\right]\psi(r,\theta)$$

$$= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{\hat{L}_z}]\psi(r,\theta)$$

$$P_{z,\delta\theta} = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{L}_z$$

令 $\theta = N\delta\theta$ $\Big\downarrow$

$$P_{z,\theta} = \left(P_{z,\frac{\theta}{N}}\right)^N = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{L}_z\right)^N = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}$$

（2）与转动$R\,(\vec{\omega},\theta)$相应的算符$P_{\vec{\omega},\theta}$

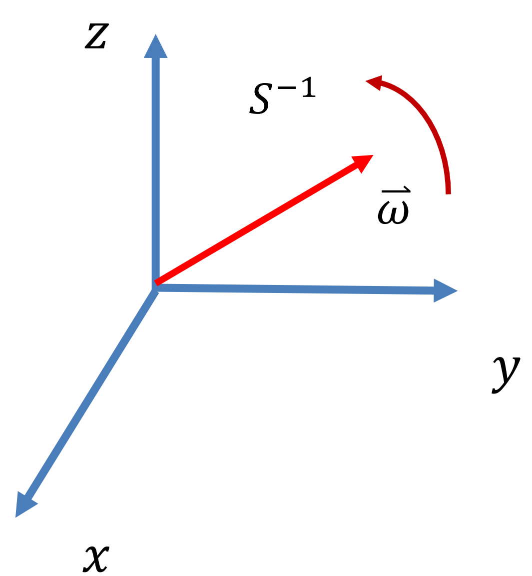
- $\vec{\omega}$是任意转轴，θ是转动角度

分三步：

1，做一个转动使 $\vec{\omega}$ 与 z 轴重合； $\boxed{S^{-1}}$

2，绕 z 轴转过 θ 角；

3，把转轴 $\vec{\omega}$ 转回原来位置。



$$R\,(\vec{\omega},\theta) = SR\,(\vec{z},\theta)S^{-1}$$

$\vec{z}$ 轴转向 $\vec{\omega}$ 轴

$$P_{\vec{\omega},\theta} = P_S P_{\vec{z},\theta} P_{S^{-1}}$$

S: $\vec{z}$ 轴转向$\vec{\omega}$ 轴

$$\begin{bmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ S_{yx} & S_{yy} & S_{yz} \\ S_{zx} & S_{zy} & S_{zz} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$S_{xz} = \omega_x, S_{yz} = \omega_y, S_{zz} = \omega_z$$

$$S_{\alpha z} = \omega_\alpha, \alpha = x, y, z$$

其余六个元素有一定任意性

求取 $P_{\vec{\omega},\theta} = P_S P_{z,\theta} P_{S^{-1}}$

$$\Downarrow \quad P_{z,\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z}$$

$$P_{\vec{\omega},\theta} = P_S e^{-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z} P_{S^{-1}} = P_S \left(\sum_n \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z\right)^n \right) P_{S^{-1}}$$

$$= \sum_n \frac{1}{n!} \left(P_S \left(-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z\right) P_{S^{-1}} \right)^n$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\theta [P_S \hat{L}_z P_{S^{-1}}]}$$

求取 $\boxed{P_S \hat{L}_z P_{S^{-1}}}$

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z P_{S^{-1}}\psi(\vec{r}) = \frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z\psi(S\vec{r})$$

也是矢量

$$= P_S(\vec{r}\times\boxed{\vec{\nabla}})_z\psi(S\vec{r})$$

$\vec{r}' = S\vec{r}$

证明：P159, 习题1

$$= P_S\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z\psi(S\vec{r})$$

计算 $\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z$ （*1）

试证明：若有$x_i' = \sum_j R_{ij}x_j$ ，则有 $\frac{\partial}{\partial x_i'} = \sum_j R_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}$

$$S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}') = \begin{pmatrix} S_{xx}^{-1} & S_{xy}^{-1} & S_{xz}^{-1} \\ S_{yx}^{-1} & S_{yy}^{-1} & S_{yz}^{-1} \\ S_{zx}^{-1} & S_{zy}^{-1} & S_{zz}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_x \\ (\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_y \\ (\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_z \end{pmatrix}$$

$$\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z = \sum_{\alpha} S_{z\alpha}{}^{-1}\,(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_\alpha = \sum_{\alpha} S_{\alpha z}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_\alpha$$

$\alpha = x, y, z$ $\qquad$ $S_{\alpha z} = \omega_\alpha$

$$\Downarrow$$

$$\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z = \sum_{\alpha} \omega_\alpha\,(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_\alpha$$

代入（*1）

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_zP_{S^{-1}}\psi(\vec{r})=P_S\sum_\alpha\omega_\alpha(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_\alpha\,\psi(\vec{r}')$$
$$=P_S\omega\cdot(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\psi(\vec{r}')$$
$$=P_S\omega\cdot(S\vec{r}\times S\vec{\nabla})\psi(\vec{r}')$$
$$=\omega\cdot(S(S^{-1}\vec{r})\times S(S^{-1}\vec{\nabla}))\psi(S^{-1}\vec{r}')$$
$$=\omega\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})\psi(\vec{r})$$

明确 P_S 的

作用范围

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_zP_{S^{-1}}=\vec{\omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})$$
$$P_S\hat{L}_zP_{S^{-1}}=\frac{\hbar}{i}\vec{\omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})=\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}$$

$\Rightarrow$

$$P_{\vec{\omega},\theta}=e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}}$$

完全转动群的不可约表示

- 全部正当转动$R\ (\vec{\omega},\theta)$ 组成了完全转动群$SO(3)$

  ----无限连续群，描述球对称系统转动特性的群。

任意的两个转轴 $\vec{\omega},\vec{\omega}'$ ，总可以通过群中的元素实现重合，所以，转角相同的一切转动构成一类

$$P_{\vec{\omega},\,\theta} = P_S P_{\vec{\omega}',\theta} P_{S^{-1}}$$

求SO (3) 群的不可约表示

- （1）取球谐函数$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 作为不可约表示的基函数

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi)$$

给定 l: $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

本征函数简并度： $2l+1$

$$l_z = m\hbar$$

m： magnetic quantum number

$$[\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{L}}^2] = 0$$

$$\boxed{P_{\vec{\omega},\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}}}$$

$$[P_{\vec{\omega},\theta}\ ,\ \ \hat{\vec{L}}^2] = 0$$

$$P_{\vec{\omega},\theta}\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\hat{\vec{L}}^2 P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 \boxed{P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi)}$$

$$\Updownarrow$$

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi)$$

本征函数简并度： $2l+1$

$$P_{\vec{\omega},\theta}Y_l^m(\theta,\varphi)=\sum_{m'}D^l(\vec{\omega},\theta)_{m'm}Y_l^{m'}(\theta,\varphi)$$ （*2）

本征函数的线性叠加

$$l:\ m'=-l,-l+1,\dots,l-1,l$$

$2l+1$个球谐函数$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 形成了$SO(3)$ 群的一个$2l+1$维表示的基函数

奇数维表示

特征标是类的函数

- 绕任意轴转动相同角度是一类：
  特征标是转角的函数，

选个最简单的情形吧

球坐标系

$$R(\vec{z},\alpha)(\theta,\varphi)=(\theta,\varphi+\alpha)$$

$$R^{-1}(\vec{z},\alpha)(\theta,\varphi)=(\theta,\varphi-\alpha)$$

Legendre 函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$P_{\vec{z},\alpha}Y_l^m(\theta,\varphi)=Y_l^m(\theta,\varphi-\alpha)=P_l^m(\cos\theta)e^{im(\varphi-\alpha)}$$

$$=Y_l^m(\theta,\varphi)e^{-im\alpha}$$

比较（*2）

$$\boxed{D^l(z,\alpha)_{m'',m}=e^{-im\alpha}\delta_{m',m}}$$

表示矩阵：对角阵

$$D^l(z,\alpha)=\begin{bmatrix} e^{-il\alpha} & & & 0 \\ & e^{-i(l-1)\alpha} & 0 & \\ & 0 & \ddots & \\ 0 & & & e^{il\alpha} \end{bmatrix}$$

所以，在第 l 个表示中，转角为 α 这一类的特征标为

$$\boldsymbol{\chi^l(\alpha)=\sum_{m=-l}^{l} e^{-im\alpha}=e^{-il\alpha}\sum_{n=0}^{2l}(e^{i\alpha})^n}$$

$$=e^{-il\alpha}\frac{e^{i(2l+1)\alpha}-1}{e^{i\alpha}-1}=\frac{\sin(l+1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)}$$

小结

- 以不同 l 的球谐函数为基函数的不可约表示，是 $SO(3)$ 群的全部 $2l+1$ 维不可约表示，计算比较复杂。

且不能求出偶数维的表示

（2）用欧拉角表征正当转动

- 固定一个坐标系$Oxyz$，及另一个可转动坐标系

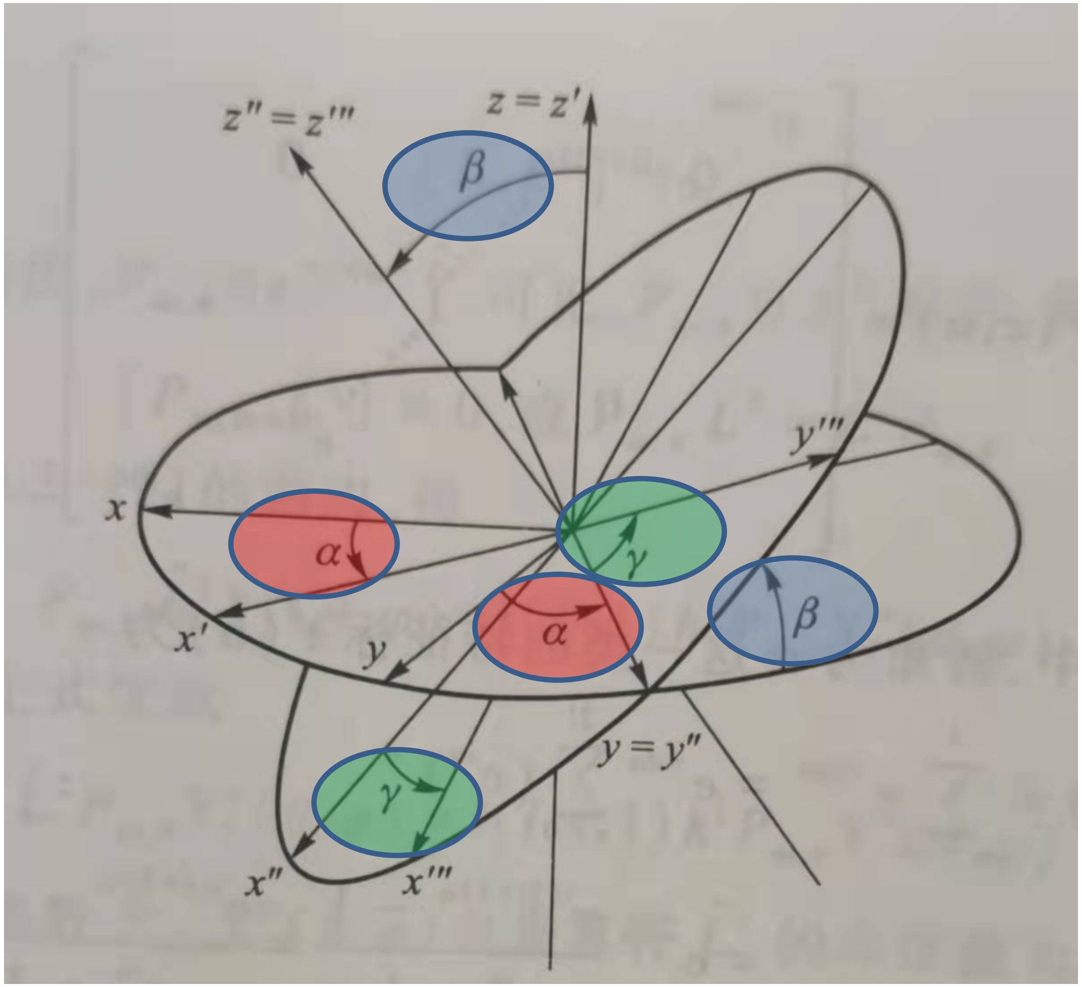
1，绕 z 轴转 α 角: x', y', $z'(z)$

2，绕 y' 轴转 β 角: x'', y'', z''

3，绕 z'' 轴转 γ 角: $x''', y''', z'''(z'')$

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

任一转动



z'' = z'''
z = z'
β
y'''
x
α
γ
x'
y
α
β
y = y''
γ
x''
x'''

转轴一直在变，不方便

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$\Updownarrow$$

等价

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)$$

证明等价性：

对固定坐标轴的转动

$$R(y,\beta)=[R(z,\alpha)]^{-1}R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

共轭元（类）

$$R(z,\gamma)=[R(z,\alpha)]^{-1}[R(y',\beta)]^{-1}R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & -\sin\gamma\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\cos\beta \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\gamma\sin\alpha\cos\beta + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{pmatrix}$$

$SO(3)$群用欧拉角表示的特征标为

$$\chi(\alpha,\beta,\gamma)=\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma-\sin\gamma\sin\alpha\cos\beta+\cos\alpha\cos\gamma+\cos\beta$$

$$=\cos\beta+（1+\cos\beta）\cos(\alpha+\gamma)$$

α, β, γ

欧拉角与转动$R\ (\vec{\omega}, \varphi)$的对应关系

λ， μ， ν，
$\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2 = 1$

$$\cos\frac{\varphi}{2} = \cos\frac{\beta}{2}\cos\frac{\alpha+\gamma}{2}$$

$$\lambda = \frac{\sin\frac{\beta}{2}\sin\frac{\alpha-\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

$$\mu = \frac{\sin\frac{\beta}{2}\cos\frac{\alpha-\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

$$\nu = \frac{\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\alpha+\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

- 用欧拉角表示正当转动后，仍可以球谐函数为基函数，利用

$$P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'} D^l(\vec{\omega},\theta)_{m'm} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)$$

求 $SO(3)$ 群的第 l 个不可约表示。

需要做替换

$$P_{\vec{\omega},\theta} \to P_{R(\alpha,\beta,\gamma)} = P_{z,\alpha} P_{y,\beta} P_{z,\gamma}$$

$$Y_l^m(\vec{r}) \to \frac{x^m y^n z^p}{r^l}, \qquad m+n+p=l$$

很繁琐！

3.3 二维幺模幺正群$SU(2)$

- 二维矩阵$u = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ 满足

（1） $uu^\dagger = u^\dagger u = I_0$ ， 单位阵

（2）$\det u = 1$ --------- 幺正幺模阵

条件（1，2）：

$$a = d^*, b^* = -c, aa^* + bb^* = 1$$

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$ 三个独立参数

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\xi}\cos\eta & e^{i\zeta}\sin\eta \\ -e^{-i\zeta}\sin\eta & e^{-i\xi}\cos\eta \end{bmatrix}$$

Cayley-Klein parameters:

ξ, η, ζ (real)

Xi(ksi), eta, zeta

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \qquad aa^* + bb^* = 1$$

这样的矩阵集合构成群：$SU(2)$

（1）封闭性：幺正阵相乘仍为幺正阵，行列式为1的矩阵相乘依然是行列式为1

（2）单位元：$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

（3）逆元： 行列式为 1， 非奇异矩阵，有逆

（4）结合律： 矩阵乘法满足结合律

$SO(n)$群的独立参数分析

- n^2 real parameters (orthogonal matrix)

- only $\frac{n^2+n}{2} = n(diagonal) + \frac{n^2-n}{2}\ (off-diagonal)\ \ independent\ equations$

$SO(n)$ $$M_{ij} = \sum_k R_{ik}\tilde{R}_{kj} = \sum_k R_{ik}R_{jk} = M_{ji} = \delta_{ij}$$

Above / Below the diagonal line provide the same constraint

The independent real parameters :

$$n^2 - \frac{n^2+n}{2} = \frac{n^2-n}{2}$$

$SU\,(n)$群的独立参数分析

- n^2complex parameters: $2n^2$ real parameters (real + imaginary part)
- Unitary $uu^\dagger = u^\dagger u = I_0$: n^2 $equations$

only $\frac{n^2+n}{2}$ $independent\ equations$

off-diagonal equations : $(n^2-n)/2$，给出(n^2-n)个对实数变量的限制。

diagonal equations： each term 是实数，没有虚部，等式左边不会出现虚部，对角元意味着矢量的模长，于是直接给出(n)个限制

另外， $\det u = 1$ 是对 $u = u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$ 中相位必须为0的约束，这个全局相位的引入不改变上述所有方程的描述。

$SU(n)$

所以独立实数参量是 $2n^2 - 2\times\frac{n^2-n}{2} - n - 1 = n^2 - 1$

二维幺正幺模群与完全转动群

- 共同点：三个独立参数

（1） h矩阵

（a） 二维迹为0的厄米矩阵，是pauli矩阵的线性组合

已知pauli 矩阵

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$h = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

$$= \begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix}$$

$$\boxed{h = h^\dagger}$$

$$x = \frac{h_{12} + h_{21}}{2}, \qquad y = \frac{h_{21} - h_{12}}{2i}, \qquad z = h_{11} = -h_{22}$$

(b) 用 u 矩阵对 h 做幺正变换

$$h' = uhu^{-1} = \begin{bmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{bmatrix} = \vec{r}\,' \cdot \vec{\sigma}$$

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \Rightarrow u^{-1} = \begin{bmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$h' = uhu^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{bmatrix}$$

$$h = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

$$h' = uhu^{-1}$$

$$h' = \vec{r}' \cdot \vec{\sigma}$$

$$\vec{r} \to \vec{r}' \qquad \vec{r}' = R(u)\vec{r}$$

每一个使矩阵 h 变成 h' 的幺模幺正阵 u， 总存在一个 3×3 的矩阵$R(u)$使得$\vec{r}(x,y,z)$ 变成 $\vec{r}'(x',y',z')$

$$R(u) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & \frac{-i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) & -(a^*b^* + ab) \\ \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & i(a^*b^* - ab) \\ a^*b + ab^* & i(a^*b - ab^*) & aa^* - bb^* \end{pmatrix}$$

- （2） $R(u)$的性质

（a） $R(u)$是个实矩阵： r_i', r_i 都是实数

$$r_i' = \sum_j R(u)_{ij}\, r_j$$

（b）$R(u)$是转动矩阵：

幺正变换不改变矩阵的行列式

$$\det h' = \det u \cdot \det h \cdot \det u^{-1} = \det h$$

$$\det h = -z^2 - (x+iy)(x-iy) = -(x^2+y^2+z^2)$$

$$\det h' = -(x'^2+y'^2+z'^2)$$

$$x'^2+y'^2+z'^2 = x^2+y^2+z^2$$

$R(u)$：保长变换，因而保角，故为转动矩阵

内积是标量

- （c） $\det R\,(u) = 1$

　　转动矩阵的行列式为1或-1，这里所有的转动矩阵，可由矩阵 u 的参量 (a, b) 连续变化而得，

$$(1,0) \rightarrow u = I_0 \rightarrow \det R\,(I_0) = 1$$

行列式不能发生由1到-1的跳变，对于所有参量(a, b)都有$\det R\,(u) = 1$

$R(u)$： 三维空间的正当转动

（d）举例

- 例一 u是对角阵

$$u=\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a^* \end{bmatrix} \qquad aa^*=1$$

$\boxed{\text{取} a=e^{-i\frac{\alpha}{2}}}$

$$u_1(\alpha)=\begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$R_1(\alpha)=\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow R(z,\alpha)$$

- 例二　　选择一个实矩阵

$$u_2(\beta) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}$$

$$\Big\downarrow$$

$$R_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \qquad \to R(y,\beta)$$

（3） $SU(2)$ 与 $SO(3)$ 同态

已知欧拉角表征的正当转动：

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)$$

$$u(\alpha,\beta,\gamma)=u_1(\alpha)\ u_2(\beta)\ u_1(\gamma)$$

$$=\begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}$$

$SU(2)$ covers $SO(3)$ twice

- 零迹矩阵 h 作为媒介

$$h' = \boxed{u}\, h u^{-1}$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{r}\,' = \boxed{R(u)}\, \vec{r}$$

- but

$$h' = \boxed{(-u)}\, h(-u^{-1})$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{r}\,' = \boxed{R(u)}\, \vec{r}$$

$$\left.\begin{matrix} u \\ -u \end{matrix}\right\} \rightarrow R(u)$$

2:1 的同态关系

几何原因

- 等价转动： $\alpha \Leftrightarrow \alpha + 2\pi$

$$R(z,\alpha) = R(z,\alpha + 2\pi)$$

但对于二维幺正幺模矩阵不一样

$$u_1(\alpha + 2\pi) = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+2\pi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha+2\pi}{2}} \end{bmatrix} = -u_1(\alpha)$$

$SO(3)$

$SU(2)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha + 2\pi,\beta,\gamma)$$

$$u(\alpha,\beta,\gamma), \quad -u(\alpha,\beta,\gamma)$$

$SO(3)$转动→ SU(2)转动

由自旋pauli矩阵张开的代数空间（2维厄米零迹）， 测量算符由$\widehat{\boldsymbol{O}} = \vec{\boldsymbol{r}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{x}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{y}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{y}} + \boldsymbol{z}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{z}}$表示。设初始$\vec{\boldsymbol{r}} = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1})$， $\vec{\boldsymbol{r}}$ 经过旋转变换（绕着$\boldsymbol{y}$轴转$\boldsymbol{\theta}$角）得到$\vec{\boldsymbol{r}}'$，求算符$\widehat{\boldsymbol{O}}' = \vec{\boldsymbol{r}}' \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}$的本征矢量。

$$\widehat{\boldsymbol{O}}' = \vec{r}' \cdot \vec{\sigma} = \sin\theta\,\hat{\sigma}_x + \cos\theta\,\hat{\sigma}_z$$

对应关系

$$\vec{r} = (0,0,1) \Rightarrow \vec{r}\,' = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$$

$$|\uparrow\rangle \Rightarrow |+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$$

$\hat{\boldsymbol{O}}'|+\rangle = |+\rangle$

- 三维空间中 $\vec{r}$ 矢量的θ角旋转，
- 自旋空间中本征矢$|\uparrow\rangle$ 的 $\theta/2$角旋转。

3.4 $SU(2)$群的不可约表示

- 二维幺正幺模矩阵组成的群，本身即为群的一个表示。

取这个二维表示的基为ξ_1，ξ_2

（表示空间V：二维复向量空间）

two-component complex vector (spinor)

$$\xi_i' = P_u \xi_i = \sum_{j=1}^{2} \xi_j u_{ji}$$

$$[\xi_1' \quad \xi_2'] = [\xi_1 \quad \xi_2] \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$

$$= [\ a\xi_1 - b^*\xi_2, \quad b\xi_1 + a^*\xi_2 \quad]$$

$SU(2)$群的其他表示

选取 ξ_1，ξ_2 的齐次单项式作为 $SU(2)$ 群表示的基函数

Homogeneous polynomial (nth degree) $\xrightarrow{U}$
Homogeneous polynomial (nth degree)

See also

《mathematical methods for physicists》3rd version :chap-4 P253~

3 维： $\xi_1{}^2, \xi_1\xi_2, \xi_2{}^2$

4 维： $\xi_1{}^3, \xi_1{}^2\xi_2, \xi_1\xi_2{}^2, \xi_2{}^3$

。 。 。　　。 。 。　　。 。 。

$n+1$维： $\xi_1{}^n, \xi_1{}^{n-1}\xi_2, \cdots, \xi_1\xi_2{}^{n-1}, \xi_2{}^n$

基函数的一般形式：$\boxed{{\xi_1}^{n-a}{\xi_2}^{a}}$

- 为了表示幺正性，及与完全转动群相联系

$$n = 2j, a = j - m$$

正整数，

$$j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$$

$$m = -j, -j + 1, \ldots, j - 1, j$$

表示编号

$$f_m^j(\xi_1, \xi_2) = \frac{{\xi_1}^{j+m}{\xi_2}^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}$$

表示维数：$2j + 1$

计算表示

基函数：$$f_m^j(\xi_1,\xi_2)=\frac{{\xi_1}^{j+m}{\xi_2}^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}$$

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2)=\sum_{m'} f_{m'}^j(\xi_1,\xi_2)D^j(u)_{m',m}$$

另一方面

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2)=f_m^j(\xi_1',\xi_2')=\frac{(a\xi_1-b^*\xi_2)^{j+m}(b\xi_1+a^*\xi_2)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$

二项式定理 $$(x+y)^n=\sum_{r=0}^{n}\frac{n!}{r!\,(n-r)!}x^r\,y^{(n-r)}$$

$$D^j(u)_{m',m}$$

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2) = \sum_{m'=j}^{-j} \boxed{\sum_{r=0}^{j+m} \frac{(-1)^r\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j+m-r)!\,(j-r-m')!\,(r-m+m')!}\, a^{j+m-r} {b^*}^r {a^*}^{j-r-m'} b^{m'-m+r}}\; f_{m'}^j(\xi_1,\xi_2).$$

求和遍及所有使分母为有限值的那些 r 值，

$r \geq 0$，$r \leq j+m, r \leq j-m', r \geq m-m'$

计算$j=\frac{1}{2},1$ 时的 $SU(2)$ 群的表示矩阵

直接从基函数开始计算

- $P_u f_1^1(\xi_1, \xi_2) = f_1^1(\xi_1', \xi_2') = \sum_{m'} f_{m'}^1(\xi_1, \xi_2) D^j(u)_{m',m}$

$= \frac{(a\xi_1 - b^*\xi_2)^2}{\sqrt{2!0!}} = \frac{a^2}{\sqrt{2}}\xi_1{}^2 - \sqrt{2}ab^*\xi_1\xi_2 + \frac{b^{*2}}{\sqrt{2}}\xi_2{}^2$, 从这个齐次多项式可以读取第一列矩阵元$a^2, -\sqrt{2}ab^*, b^{*2}$

同理

- $P_u f_0^1(\xi_1, \xi_2) = f_0^1(\xi_1', \xi_2')$

$= \frac{(a\xi_1 - b^*\xi_2)^1 (b\xi_1 + a^*\xi_2)^1}{\sqrt{1!1!}} = ab\xi_1{}^2 + (aa^* - bb^*)\xi_1\xi_2 - a^*b^*\xi_2{}^2$

读取第二列矩阵元$\sqrt{2}\,ab, (aa^* - bb^*), -\sqrt{2}a^*b^*$

同理，

- $P_u f_{-1}^1(\xi_1, \xi_2) = f_{-1}^1(\xi_1', \xi_2')$

$$= \frac{(b\xi_1 + a^*\xi_2)^2}{\sqrt{0!\,2!}} = \frac{b^2}{\sqrt{2}}\xi_1{}^2 + \sqrt{2}ba^*\xi_1\xi_2 + \frac{a^{*2}}{\sqrt{2}}\xi_2{}^2$$

读取第三列矩阵元 $b^2, \sqrt{2}a^*b, a^{*2}$

m' \ m	1	0	-1
1	a^2	$\sqrt{2}ab$	b^2
0	$-\sqrt{2}ab^*$	$aa^* - bb^*$	$\sqrt{2}a^*b$
-1	b^{*2}	$-\sqrt{2}a^*b^*$	a^{*2}

三维表示

弄清楚基函数，矩阵指标，矩阵维度，
矩阵元与指标的对应关系

表示的性质

- （1）以 $f_m^j(\xi_1,\xi_2)$ 为基函数的表示 $D^j(u)$ 是幺正表示。

需证 $P_u \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2 = \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2$

- （2） $D^j(u)$ 是不可约表示（舒尔引理）

$$\sum_{m=-j}^{j}|f_m^j|^2=\sum_{m=-j}^{j}\frac{(\xi_1^*\xi_1)^{j+m}(\xi_2^*\xi_2)^{j-m}}{(j+m)!\,(j-m)!}$$

$$=\frac{1}{(2j)!}(|\xi_1|^2+|\xi_2|^2)^{2j}$$

$SU(2)$群

二维幺正表示的基函数

$$P_u(|\xi_1|^2+|\xi_2|^2)=|\xi_1|^2+|\xi_2|^2$$

$$P_u\sum_{m=-j}^{j}|f_m^j|^2=\frac{1}{(2j)!}P_u(|\xi_1|^2+|\xi_2|^2)^{2j}$$

$$=\frac{1}{(2j)!}(|\xi_1|^2+|\xi_2|^2)^{2j}$$

$$=\sum_{m=-j}^{j}|f_m^j|^2$$

- （3）$D^j(u)$是$SU(2)$ 群的非忠实(unfaithful)表示

$u, -u$ 两个不同的群元

$$D^j(u) = (-1)^{2j} D^j(-u)$$

j 取整数时， $D^j(u) = D^j(-u)$

两个不同的群元对应同样的表示矩阵，非忠实表示

j 取半奇数时， $D^j(u) = -D^j(-u)$

$D^j(u)$ 与 u 一一对应，忠实表示

可证，所求得的表示是$SU(2)$群的全部不可约表示

表示$D^j(u)$ 的特征标

- 确定 $SU(2)$ 群类结构：

  幺模幺正矩阵的本征值方程

$$u\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$$

本征值 λ 满足方程

$$\lambda^2-(a+a^*)\lambda+1=0$$

$$\lambda_1=\frac{\beta+\sqrt{\beta^2-4}}{2},\quad \lambda_2=\frac{\beta-\sqrt{\beta^2-4}}{2},\quad \beta=a+a^*$$

$\mathrm{Re}(a)\in[-1,1],-2\le\beta\le 2$ $\qquad\beta=\pm 2,\lambda_1=\lambda_2$

$aa^*+bb^*=1$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4}}{2},$$

$$-2 < \beta < 2$$

$$\lambda_1 = {\lambda_2}^*，\ \lambda_1\lambda_2 = 1$$

定义一个 α 值：$\cos\frac{\alpha}{2} = \frac{\beta}{2}$，那么 $\sin\frac{\alpha}{2} = \frac{\sqrt{\beta^2-4}}{2}$

$$\lambda_1 = \exp(i\frac{\alpha}{2}), \lambda_2 = \exp(-i\frac{\alpha}{2}), 0 \le \alpha \le 2\pi$$

本征值只决定于$\beta(= a + a^*)$ --------- a的实部Re(a)

因此，所有具有相同的 Re(a) 的 $SU(2)$ 群的群元都有相同的本征值，群元彼此共轭：

$\mathrm{Tr}(A) = \mathrm{Tr}(BAB^{-1}) = \beta$。

$$0 \le \alpha \le 2\pi$$

每一个 $\mathrm{Re}(a)$ 值确定 $SU(2)$ 群的一个类

取 u 中 的 $a = \exp(i\frac{\alpha}{2}), b = 0$

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{bmatrix}$$

相应的表示 $D^j(e^{i\frac{\alpha}{2}}, 0)_{m',m} = e^{im\alpha}\delta_{m'm}$

$$D^j(u)_{m',m} = \boxed{\sum_{r=0}^{j+m} \frac{(-1)^r \sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j+m-r)!\,(j-r-m')!\,(r-m+m')}} \cdot$$

$$a^{j+m-r} b^{*r} a^{*j-r-m'} b^{m'-m+r}$$

$$a = \exp(i\frac{\alpha}{2}), b = 0$$

$$r = 0, m = m'$$

$$D^j(u)_{m',m} = \left(e^{i\frac{\alpha}{2}}\right)^{j+m} \left(e^{-i\frac{\alpha}{2}}\right)^{j-m} = e^{im\alpha}\delta_{m'm}$$

$$\chi^j(e^{i\frac{\alpha}{2}}, 0) = \sum_{m=-j}^{j} e^{im\alpha} = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

P138,(3.2-30)

j 可取整数，半奇数

l 取整数

李群（Lie group）

- 连续群
- 每一个元素由一组独立的实参数来描写，
  参数在欧氏空间一定区域内连续变化。

参数变化区域：群空间。

独立实参数数目g：群空间维度。

Lie algebra rank: 互相对易的生成元的最大个数。因为SO(3),SU(2)
生成元都互相不对易，所以阶为1，另外还有一个叫做卡塞米尔算符(Casimir)的概念
卡塞米尔算符定义为与李群所有生成元都对易的算符。
理论证明李群的卡塞米尔算符的个数等于李群的阶数（rank）。所以SO(3)和SU(2)群
都只有一个卡塞米尔算符，它就是角动量平方L^2.

Casimir个数为偶数，**rank even**；　　Casimir个数为奇数→ **rank odd**

SO(4), SU(3): rank 2

A . Zee (P367) **Cartan subalgebra**

Out of the set of n X^as, find the maximal subset of mutually commuting generators H^i, $i = 1, 2, \ldots, l$, so that

- $[H^i, H^j] = 0$, i , $j = 1, \ldots, l$

the important number l is known as the **rank**

The number of the generators refers to the **order**

MATHEMATICAL METHODS FOR PHYSICISTS

SIXTH EDITION

George B. Arfken
Miami University
Oxford, OH

Hans J. Weber
University of Virginia
Charlottesville, VA

Table 4.2 Rank and Order of Unitary and Rotational Groups

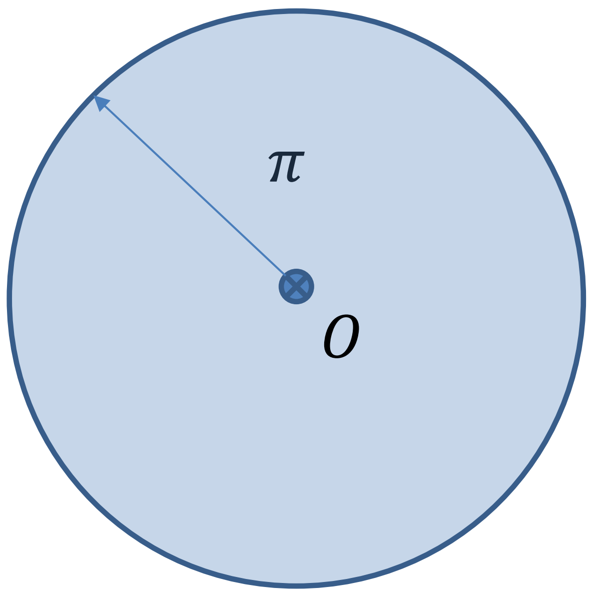
Lie algebra	$\mathcal{A}_l$	$\mathcal{B}_l$	$\mathcal{D}_l$
Lie group	$SU(l+1)$	$SO(2l+1)$	$SO(2l)$
Rank	l	l	l
Order	$l(l+2)$	$l(2l+1)$	$l(2l-1)$

Note： In a finite group, the **order** of a group ≡ the number of elements in the group.

- $SO(3)$表示空间：

$$R(\vec{\omega},\alpha)=R(-\vec{\omega}，2\pi-\alpha)$$

构建一个半径为 π 的球，球面上由直径相联系的两个点代表同一个元素。单位元在哪？



$SU(2)$的表示空间

Rotations in the two-component formalism

$$e^{\left(\frac{-i\vec{S}\cdot\vec{\hat{n}}\alpha}{\hbar}\right)} = e^{\left(\frac{-i\vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}}\alpha}{\boxed{2}}\right)}$$

$\vec{\hat{n}}$: a unit vector in some specified direction

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}})^n = \begin{cases} 1 & for\ n\ even \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}} & for\ n\ odd \end{cases}$$

$SU(2)$的表示空间

- $$\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right) = \left[1 - \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^2}{2!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^2}{4!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^4 - \cdots\right]$$
$$-i\left[(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\frac{\alpha}{2} - \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^3}{3!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^3 + \cdots\right]$$
$$= \mathbf{1}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \boldsymbol{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

- $$\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \boldsymbol{i}\,n_z\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & (-in_x - n_y)\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ (-in_x + n_y)\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \boldsymbol{i}\,n_z\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$SU(2)$的表示空间

$$u=\begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$

$\vec{\hat{n}} \to \vec{\omega}$:

$$n_z=\cos\theta$$
$$n_x=\sin\theta\cos\varphi$$
$$n_y=\sin\theta\sin\varphi$$

以单位矢量 $\vec{\omega}$ 的球坐标分量 θ,φ 来写矩阵元 。

$$a=\cos\frac{\alpha}{2}-i\sin\frac{\alpha}{2}\cos\theta\,,$$
$$b=-\sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\sin\varphi-i\sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\cos\varphi$$

对比前一页 $\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right)$ 矩阵表达式

$$u(\vec{\omega},\alpha)=I\cos\frac{\alpha}{2}-i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

$SU(2)$的表示空间

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

可证： $u(\vec{\omega}, \alpha_1)u(\vec{\omega}, \alpha_2) = u(\vec{\omega}, \alpha_1 + \alpha_2)$，

$u(\vec{\omega}, 4\pi) = 1$， $u(\vec{\omega}, 2\pi) = -1$

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = u(-\vec{\omega}, 4\pi - \alpha) = -u(-\vec{\omega}, 2\pi - \alpha)$$

$SU(2)$的表示空间

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

构建一个半径为 2π 的球，球面上所有的点代表同一个元素。

单连通

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

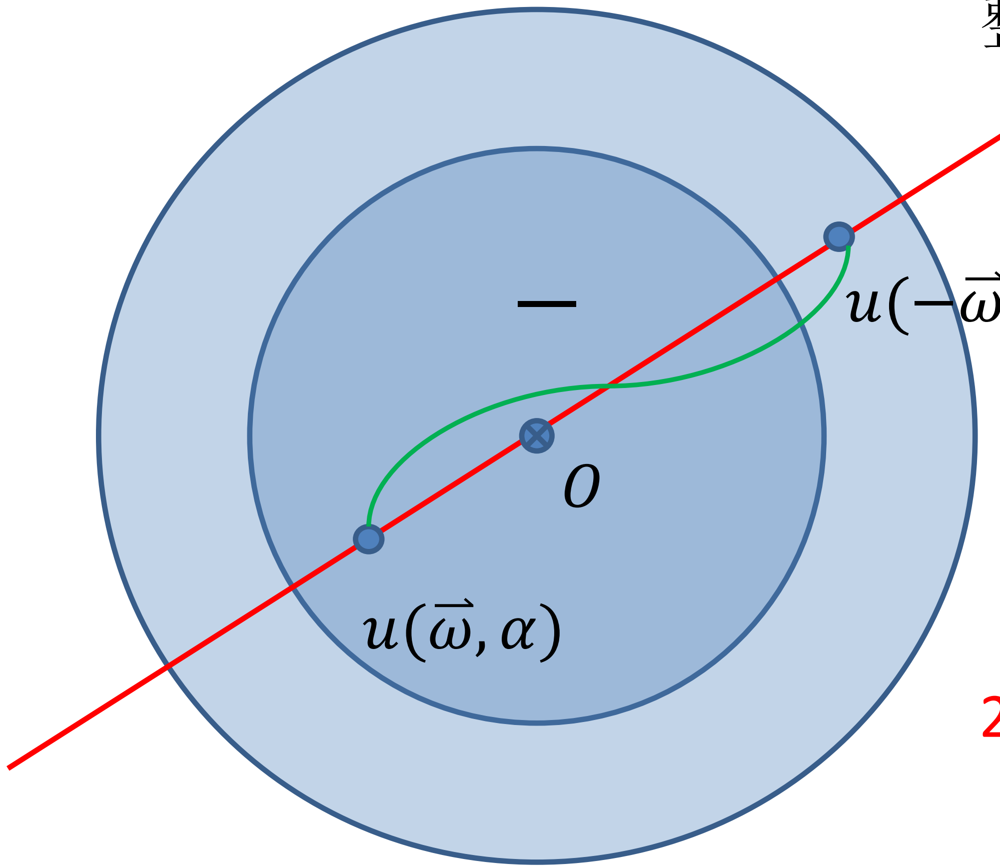
$$u(\vec{\omega}, 2\pi) = -I$$

任一个群元可由单位元出发在群空间连续变化得到。

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = -u(-\vec{\omega}, 2\pi - \alpha)$$

$$R(\vec{\omega}, \alpha) = R(-\vec{\omega}, \ 2\pi - \alpha)$$

$u(\vec{\omega}, 2\pi) = -1$，
整个球面等值



2 : 1 的同态关系

You can check

$U = \exp\left(\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right)$
$U(2\pi) = -I,\ U(4\pi) = I$ *: double covering, only locally isomorphic*

- $U^\dagger \sigma_1 U = cos\alpha\sigma_1 + sin\alpha\sigma_2$
- $U^\dagger \sigma_2 U = -sin\alpha\sigma_1 + cos\alpha\sigma_2$
- $U^\dagger \sigma_3 U = \sigma_3$

Half angles come in to render the Lie algebra of $SU(2)$ and $SO(3)$
the same !

SU(2) 转动→ $SO(3)$转动

Calculate :

$$U^{\dagger}\vec{\boldsymbol{r}}\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}}U$$
$$= x(cos\alpha\sigma_1 + sin\alpha\sigma_2) + \mathrm{y}(-sin\alpha\sigma_1 + cos\alpha\sigma_2) + \mathrm{z}\sigma_3$$
$$= (\mathrm{x}cos\alpha - \mathrm{y}sin\alpha)\sigma_1 + (xsin\alpha + ycos\alpha)\sigma_2 + \mathrm{z}\sigma_3 = \vec{\boldsymbol{r}}'\cdot\vec{\boldsymbol{\sigma}}$$

$$\vec{\boldsymbol{r}}' = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha})\vec{\boldsymbol{r}}$$

绕着 $\boldsymbol{z}$轴转动 $\boldsymbol{\alpha}$

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha}) = \begin{pmatrix} cos\alpha & -sin\alpha & \mathbf{0} \\ sin\alpha & cos\alpha & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

3.5 双群

- 双值表示 $u=\begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$

$$u(\alpha,\beta,\gamma)=u_1(\alpha)u_2(\beta)u_1(\gamma)$$

$$=\begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{ll} a=e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & b=-e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ b^*=-e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & a^*=e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{array}$$

- 鉴于$SU\ (2)$ 和$SO(3)$的同态关系，用$SU\ (2)$群的不可约表示作为$SO(3)$群的不可约表示

$$D^j(\alpha, \beta, \gamma)_{m',m} = D^j(\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}, -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}})$$

$$a, b$$

这样可求$SO(3)$ 的第 j 个不可约表示，
可求相应的特征标

麻烦！

特征标是类的函数

- 选简单的来！

$$u=\begin{bmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{bmatrix}$$

取SU (2) 群中的对角元

对应$SO(3)$ 群中的群元$R(\alpha,0,0)$

$R(\alpha,0,0)$
的特征标：

$$\chi^j(e^{i\frac{\alpha}{2}},0)=\sum_{m=-j}^{j}e^{im\alpha}=\frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

分析表示

j 取整数时， $D^j(u) = D^j(-u)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \to \pm u(\alpha,\beta,\gamma)$$

j 取半奇数时， $D^j(u) = -D^j(-u)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \to \pm u(\alpha,\beta,\gamma)$$

$$\downarrow$$

$$\pm D^j(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$$

$SO(3)$群中一个群元对应两个表示矩阵

------------ 双值表示

双值表示的不便

$$D^j(R)D^j(S) = \pm D^j(RS)$$

将 $SO(3)$ 群元扩大一倍：

保证每一个元

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \rightarrow u(\alpha,\beta,\gamma)$$

$SU(2)$.vs. $SO(3)$: 2:1 的同态关系

原因： $R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha + 2\pi,\beta,\gamma)$

如果我们将等式两边的群元处理成不同的群元？
每一个转动将与一个 u 相对应

具体执行方案

- （1）定义一个新的元 $\bar{E}$ 为绕某轴（比如 z 轴）转 2π 的转动。单位元$E = \bar{E}\bar{E}$ 为绕某轴转 4π 的转动

- （2）将$SO(3)$群的每一个元都与 $\bar{E}$ 相乘，得到 g 个新群元。

- （3）将 g 个新群元与$SO(3)$ 群原有的g 个群元放在一起，可以证明， 这 $2g$ 个群元组成一个群，此群称为的双群（或复盖群），记作$SO^D(3)$

$SO^D(3)$ 与 $SU(2)$ 同构

$SO^D(3)$ 与 $SU(2)$ 同构

$D^j(\alpha，\beta，\gamma)$ 成为单值表示，不论 j 取何值

问： $SO(3)$ 是 $SO^D(3)$ 的子群吗？

不是，不封闭， 在新的群 $SO^D(3)$乘定义下，周期变了。

旋量波函数

- 与双群相关的物理系统：

  电子的自旋角动量 $s_x = \pm\frac{\hbar}{2}$

  算符$\hat{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\hat{\sigma}}$

  对易关系：$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$

  与轨道角动量的相同

$$\hat{\hat{J}} = \hat{\hat{L}} + \hat{\hat{S}}$$

总角动量算符

$\hat{\vec{J}}$与$\hat{J}_z$有共同的本征函数ψ_{jm}

$$\hat{\vec{J}}^2\psi_{jm} = j(j+1)\hbar^2\psi_{jm}$$

$$J_z\psi_{jm} = m\hbar\psi_{jm}$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots; \ \ m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

ψ_{jm}： 电子波函数（位置+自旋）

$$\psi_{jm} = \psi_{jm}(x, y, z, \hat{S}_z, t)$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi_{jm}(x, y, z, \frac{\hbar}{2}, t) \\ \psi_{jm}(x, y, z, -\frac{\hbar}{2}, t) \end{array}}$$

旋量波函数

$$\psi_{jm} = \begin{bmatrix} \psi_1(x,y,z,\frac{\hbar}{2},t) \\ \psi_2(x,y,z,-\frac{\hbar}{2},t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{bmatrix} = \psi_{jm}(\vec{r},t)$$

发生一个任意转动$R\ (\vec{\omega},\theta)$时

$$P_R = P_{\vec{\omega},\theta} = e^{-i\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{J}}/\hbar}$$

$$P_{\vec{\omega},\theta}\psi_{jm} = \sum_{m'} \underbrace{\psi_{jm'}}_{\text{表示矩阵的基}}\, \underbrace{D^j(\vec{\omega},\theta)_{m',m}}_{\text{完全转动群表示矩阵}}$$

绕 z 轴转 α 角

$$P_{z,\alpha}\psi_{jm}(\vec{r}) = e^{-i\alpha J_z/\hbar}\psi_{jm}(\vec{r})$$

$$P_{z,\alpha}\psi_{jm}(\vec{r}) = e^{-im\alpha}\psi_{jm}(\vec{r})$$

Mobius strip

$$\alpha = 2\pi$$

j 为整数， m 也为整数， $P_{z,2\pi}\psi_{jm}(\vec{r}) = \psi_{jm}(\vec{r})$

j 为半奇数，m也为半奇数， $P_{z,2\pi}\psi_{jm}(\vec{r}) = -\psi_{jm}(\vec{r})$

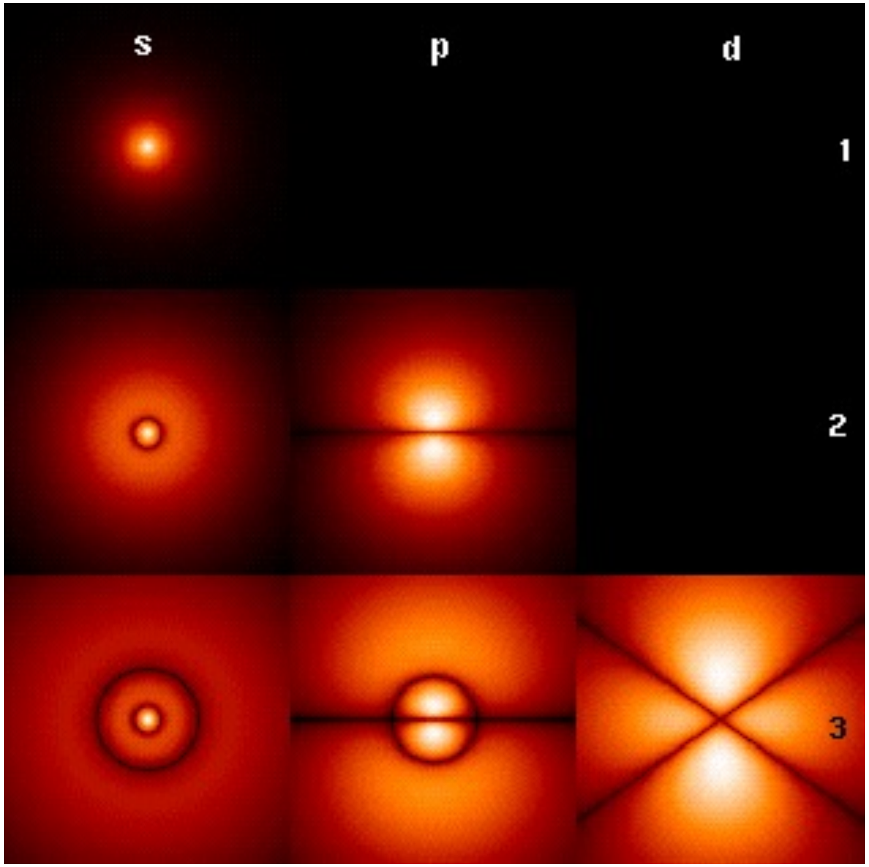
半奇数自旋角动量粒子旋量波函数特性：
转 $\boldsymbol{4\pi}$ 才能还原， 被双群所描述。

Visualizing the hydrogen electron orbitals – from wiki

- Probability densities through the *xz*-plane for the electron at different quantum numbers (ℓ, across top; *n*, down side; $m = 0$)
- The image to the right shows the first few hydrogen atom orbitals (energy eigen-functions). These are cross-sections of the probability density that are color-coded (black represents zero density and white represents the highest density).
- The angular momentum (orbital) quantum number ℓ (*s* means $\ell = 0$, *p* means $\ell = 1$, *d* means $\ell = 2$).
- The main (principal) quantum number *n* (= 1, 2, 3, ...) is marked to the right of each row.
- the cross-sectional plane is the *xz*-plane (*z* is the vertical axis). The probability density in three-dimensional space is obtained by rotating the one shown here around the *z*-axis.

- The "ground state", i.e. the state of lowest energy, in which the electron is usually found, is the first one, the 1s state (principal quantum level n = 1, ℓ = 0).

- Black lines occur in each but the first orbital: these are the nodes of the wave function, i.e. where the probability density is zero. (More precisely, the nodes are spherical harmonics that appear as a result of solving Schrödinger's equation in polar coordinates.)



Probability densities through the xz-plane for the electron at different quantum numbers
(ℓ, across top; n, down side; m = 0)